

C.N.E.A. Biblioteca	
ARCHIVO PUBLICACIONES	
Nº 1	Nº 1969

02.69.11

INTERACCION MAGNON-FONON EN METALES DE TRANSICION *) **)

por

J. ROBERTO IGLESIAS.

Instituto de Física Balseiro
Universidad Nacional de Cuyo
Centro Atómico Bariloche
C.N.E.A.

- *) Presentado al Instituto de Física Balseiro, U.N.C., como Trabajo Especial de la Licenciatura en Física.
- **) Este trabajo ha sido realizado con el asesoramiento de los Dres. ARTURO LOPEZ y BLAS ALASCIO.

Bariloche, Noviembre 1969



A SUSANA MERCEDES

"Cuando un efecto energético anormal a la disposición magnética que relaciona a las "bulus" entre sí, origina una perturbación en cualquier punto del universo, esa perturbación proyecta su influencia ondulatoriamente hacia todos los sentidos."

(Carlos Chalita:"Teoría de las Bulus". De Filpo Y Cianciarulo Ed.1952)

INDICE

INTRODUCCION..... 2
HAMILTONIANO DE BANDAS..... 5
MAGNONES..... 8
INTERACCIONES INTERATOMICAS.....13
INTERACCION MAGNON-FONON.....17
INTERACCION MAGNON-FONON EN EL MODELO DE HEISENBERG.....23
CONCLUSIONES.....25
REFERENCIAS.....27



INTERACCION MAGNON-FONON EN METALES DE TRANSICIONRESUMEN

Sobre la base del Hamiltoniano de bandas propuesto por Hubbard⁽¹⁾⁽²⁾, y el Hamiltoniano de interacción electrón-fonón introducido por Rajagopal y Joshi⁽³⁾, estos autores y Alascio y López⁽⁴⁾ han realizado cálculos de interacción magnón-fonón usando la RPA (Random Phase Aproximation).

En el presente trabajo se suma al Hamiltoniano un término de interacción entre electrones de átomos vecinos. Considerando que los baricentros de las funciones de onda no están fijos sino que se desplazan de sus posiciones de equilibrio por efecto de los fonones, se desarrollan las integrales de Coulomb y de intercambio en función de los b_k y b_k^* (operadores de creación y aniquilación de fonones), se calcula la ecuación de movimiento de los magnones en la RPA y se compara con un desarrollo similar partiendo del modelo de Heisenberg.

INTRODUCCION

Los metales de transición se caracterizan por tener una capa d incompleta. El nivel 3d presenta diez orbitales (cinco con spin "up" y cinco "down"). De ellos el Fe tiene 6 ocupados, el Co 7, y el Ni 8.

Los orbitales d están concentrados en las cercanías de los núcleos y por esa causa no se les puede aplicar la teoría del gas de electrones libres. En realidad, los electrones d se comportan experimentalmente en forma dual. De algunas experiencias podría inferirse que están bien localizados en cada sitio de la red, y de otras, que forman una banda. Ciertas propiedades como la variación de la magnetización en $T^{\frac{3}{2}}$ (ley de Bloch) a bajas temperaturas y que la susceptibilidad siga una ley en $(T-T_c)^{-1}$ por encima de T_c (Temperatura de Curie), para Fe y Co (No así para Ni), indican un comportamiento "atómico" o de electrones localizados. Otras, como un valor más alto del esperado para el calor específico electrónico; o que el momento magnético de saturación (que debería ser, de acuerdo al modelo atómico $g\mu_B S$) sea un número no-entero de magnetones de Bohr: 2.22, 1.17, y 0.66 para Fe, Co y Ni, respectivamente pueden entenderse sólo con un modelo de bandas (1). Para un estudio detallado de la estructura electrónica de los metales de transición, en particular de las bandas d puede consultarse, por ejemplo, una publicación de Mott (5) al respecto.

Considerando solamente los fenómenos magnéticos, que son nuestro interés en el presente trabajo, esta dualidad se traduce en dos modelos para explicar el ferromagnetismo.

El modelo de electrones localizados basado en el Hamiltoniano de Heisenberg (6)(7):

$$H = -J \sum_{ij} \bar{S}_i \cdot \bar{S}_j$$

Donde \bar{S}_i es un spin localizado en el sitio i de la red y J es, en el trabajo original de Heisenberg, la integral de intercambio.

$$J_{ij} = \int \phi_i^*(x) \phi_j^*(y) V(x-y) \phi_i(y) \phi_j(x) dx dy$$

Donde V es el potencial coulombiano entre electrones.

Sin embargo, los cálculos realizados (7) dan un valor muy pequeño de J, de acuerdo a las propiedades experimentales de los ferromagnetos, por lo

que se lo toma generalmente como un parámetro fenomenológico.

Si consideramos a los electrones d como no-localizados, tenemos un modelo de magnetismo de bandas ⁽²⁾⁽⁸⁾⁽⁹⁾⁽¹⁰⁾⁽¹¹⁾.

Para una banda d sin degeneración orbital, o sea con sólo dos estados posibles, y considerando la interacción entre electrones pertenecientes a un mismo átomo, el Hamiltoniano de bandas es ⁽¹⁾⁽¹²⁾:

$$H = \sum_{k\mathcal{E}} e_{k\mathcal{E}} c_{k\mathcal{E}}^* c_{k\mathcal{E}} + U/2N \sum_{kk'} \sum_{\mathcal{E}\mathcal{E}'} c_{k+q\mathcal{E}}^* c_{k\mathcal{E}} c_{k'-q\mathcal{E}'}^* c_{k'\mathcal{E}'}$$

Donde $c_{k\mathcal{E}}^*$ es un operador que crea un electrón de impulso k y spin \mathcal{E} ; y $c_{k\mathcal{E}}$ el operador de aniquilación correspondiente. Las reglas de conmutación son las conocidas

$$(c_{k\mathcal{E}}^*, c_{k'\mathcal{E}'}^*)_+ = (c_{k\mathcal{E}}, c_{k'\mathcal{E}'})_+ = 0$$

$$(c_{k\mathcal{E}}^*, c_{k'\mathcal{E}'})_+ = \delta_{kk'} \delta_{\mathcal{E}\mathcal{E}'}$$

e_k es la energía de un electrón en un potencial de Bloch. Y U es la integral de Coulomb:

$$U = \int |\psi(x)|^2 |\psi(y)|^2 V(x-y) dx dy$$

La interacción magnón-fonón en el modelo de Heisenberg y sus consecuencias han sido bien estudiadas ⁽¹³⁾⁽¹⁴⁾⁽¹⁵⁾. En un modelo no-localizado, este acoplamiento ha sido derivado de la interacción electrón-fonón por Rajagopal y Joshi ⁽³⁾, y más recientemente por Alascio y López ⁽⁴⁾. En estos cálculos se utiliza también la hipótesis de una banda d sin degeneración orbital e interacción electrónica intra-atómica. El término de interacción electrón-fonón del que se deduce el acoplamiento magnón-fonón es ⁽³⁾:

$$\sum_{kqm} \sum_{\mathcal{E}\mathcal{E}'} g_{\mathcal{E}\mathcal{E}'}^m(q) c_{k+q\mathcal{E}}^* c_{k\mathcal{E}} u_{qm}$$

Donde u_{qm} es el desplazamiento de los iones para un fonón de impulso q en el modo m y $g_{\mathcal{E}\mathcal{E}'}^m(q)$ es un parámetro de interacción.

Si bien un electrón interactúa más fuertemente con electrones pertenecientes a su mismo núcleo que a los de átomos vecinos (La integral de Coulomb intra-atómica es, para Ni, 19 eV, y la interatómica vale 1.6 eV ⁽¹⁶⁾), no podemos suponer a priori que apartamientos de los iones de sus posiciones de equilibrio no producirán variaciones relativamente grandes en las integrales de Coulomb y de intercambio. Esto se traduce en un nuevo término de

interacción electrón-fonón, de cuarto orden en las $c_{k\sigma}$.

En el presente trabajo se suma al Hamiltoniano de bandas un término de interacción interatómica; y siguiendo una publicación anterior de Thompson(16) se calcula la renormalización de la curva de dispersión de magnones introducida por este nuevo término, con la RPA (Random Phase Aproximation) y Hartree-Fock.

Se desarrollan luego las integrales U y J en función de los operadores de creación y aniquilación de fonones, y mediante un formalismo similar al usado en el caso anterior se deduce la ecuación de movimiento para magnones.

La interacción interatómica introducida en el Hamiltoniano de bandas es, en cierta manera, semejante al modelo localizado. En el Hamiltoniano de Heisenberg tenemos la energía de intercambio entre electrones situados en sitios vecinos de la red, mientras al no-localizado le hemos sumado las energías de repulsión coulombiana y de intercambio entre electrones cuyos orbitales están centrados, también, en átomos vecinos.

Podemos, entonces, a partir del Hamiltoniano de Heisenberg derivar la interacción magnón-fonón y la ecuación de movimiento para magnones, y compararla con la que hemos obtenido anteriormente. La conclusión es que ambas ecuaciones de movimiento son similares.

En las secciones preliminares se establece el hamiltoniano modelo de bandas de un metal, siguiendo la discusión de Blandin⁽²⁾; se introducen los operadores que crean excitaciones electrónicas; y, usando del Hamiltoniano de bandas se calcula la curva de dispersión de magnones:

$$\hbar\omega_{\text{magnon}} = Dq^2$$

I. HAMILTONIANO DE BANDAS⁽²⁾

Se trata de escribir un Hamiltoniano para las bandas d. Supondremos que la banda de conducción y la d son independientes, o sea que no hay interacción s-d. Esto es sólo una simplificación, pues la superposición de ambas bandas puede ser importante y adquirir valores significativos.

Los orbitales d son bastante interiores, por lo que podemos inferir que al unir los átomos para constituir un sólido no habrá gran superposición de orbitales. Será entonces una buena aproximación el desarrollar los estados de banda como combinación lineal de orbitales atómicos (LCAO). De hecho, existe "overlap" entre los orbitales, pues de no ser así no existiría ferromagnetismo⁽⁹⁾.

El hamiltoniano para la banda d es:

$$H_0 = \sum_{km\mathcal{E}} e_{km} c_{km\mathcal{E}}^* c_{km\mathcal{E}} \quad (1)$$

Donde e_{km} es el autovalor de la energía en un potencial periódico, de un electrón de vector de onda k en la m-ésima banda (Para una banda formada por orbitales d, $m = -2, -1, 0, 1, 2$). \mathcal{E} es el índice de spin.

El operador $c_{km\mathcal{E}}^*$ crea un electrón en el estado $|km\mathcal{E}\rangle$

" " $c_{km\mathcal{E}}$ aniquila un electrón en $|km\mathcal{E}\rangle$

Introduciremos ahora una interacción entre electrones. Siguiendo a Blandin, consideraremos primero las intra-atómicas.

En el formalismo de segunda cuantificación⁽¹⁷⁾ un potencial de interacción entre fermiones, en particular el de repulsión coulombiana, se escribe:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathcal{E}\mathcal{E}'} \int \psi_{\mathcal{E}}^*(x) \psi_{\mathcal{E}'}^*(y) V(x-y) \psi_{\mathcal{E}'}(y) \psi_{\mathcal{E}}(x) dx dy \quad (2)$$

Si usamos la LCAO, tenemos:

$$\begin{aligned} \psi_{\mathcal{E}} &= \sum_m c_{m\mathcal{E}} \phi_m \\ \psi_{\mathcal{E}}^* &= \sum_m c_{m\mathcal{E}}^* \phi_m^* \end{aligned} \quad (3)$$

Donde ψ y c son operadores.

Reemplazamos en (2). De los términos resultantes los únicos significativos⁽⁹⁾ son el de repulsión coulombiana y el de intercambio.

El término de interacción para el átomo i es:

$$H_i = \frac{1}{2} \sum_{m, m'} (U_{mm'} - J_{mm'}) c_{im\epsilon}^* c_{im\epsilon} c_{im'\epsilon}^* c_{im'\epsilon} + \frac{1}{2} \sum_{mm'} \sum_{\epsilon \neq \epsilon'} U_{mm'} c_{im\epsilon}^* c_{im\epsilon} c_{im'\epsilon'}^* c_{im'\epsilon'} \quad (4)$$

Donde:

$$U_{mm'} = \int |\phi_m(x)|^2 V(x-y) |\phi_{m'}(y)|^2 dx dy \quad (\text{Integral de Coulomb})$$

$$J_{mm'} = \int \phi_m^*(x) \phi_{m'}^*(y) V(x-y) \phi_m(y) \phi_{m'}(x) dx dy \quad (\text{Integral de Intercambio}).$$

Y el Hamiltoniano total para las bandas d es, entonces:

$$H = H_0 + \sum_i H_i \quad (5)$$

El trabajar con cinco bandas d , aún con la interacción simplificada (4) es todavía muy complicado, por lo tanto en lo que sigue discutiremos el caso de una sola banda (eliminando la degeneración orbital), modelo que ha sido usado con gran frecuencia.

El hamiltoniano resulta:

$$H = \sum_{k\epsilon} c_{k\epsilon}^* c_{k\epsilon} + \frac{1}{2} U \sum_{i\epsilon} c_{i\epsilon}^* c_{i\epsilon} c_{i,-\epsilon}^* c_{i,-\epsilon} \quad (6)$$

y escrito en representación de Bloch, mediante la transformación:

$$c_{k\epsilon} = 1/\sqrt{N} \sum_i c_{i\epsilon} e^{ik \cdot R(i)}$$

$$c_{i\epsilon} = 1/\sqrt{N} \sum_k c_{k\epsilon} e^{-ik \cdot R(i)}$$

Donde k es el "vector" de onda y $R(i)$ es el "vector" posición del i -ésimo átomo.

Resulta:

$$H = \sum_{k\epsilon} e_{k\epsilon} c_k^* c_{k\epsilon} c_{k\epsilon} + \frac{1}{2} U/N \sum_{kk'q\epsilon} c_{k+q\epsilon}^* c_{k\epsilon} c_{k'-q,-\epsilon}^* c_{k',-\epsilon} \quad (7)$$

Este es, con las simplificaciones y aproximaciones mencionadas, el hamiltoniano de banda d .



Apliquemos ahora un campo magnético estático \vec{G} en la dirección z.

$$\vec{G} = (0, 0, G)$$

Si la magnetización es:

$$S_z = \frac{1}{2} (n_i - n_i') = \frac{1}{2} \sum_k (n_{k_i} - n_{k_i'}) \quad (8)$$

(i-spin "up" i'-spin "down")

Entonces la energía de interacción con el campo magnético es:

$$H_G = -\frac{1}{2} g \mu_B G \sum_k (c_{k_i}^* c_{k_i} - c_{k_i'}^* c_{k_i'}) \quad (9)$$

Si definimos:

$$E_{k_i} = e_k - \frac{1}{2} g \mu_B G$$

$$E_{k_i'} = e_k + \frac{1}{2} g \mu_B G$$

El hamiltoniano resulta:

$$H = \sum_{k\mathcal{E}} E_{k\mathcal{E}} c_{k\mathcal{E}}^* c_{k\mathcal{E}} + \frac{1}{2} U/N \sum_{kk'q\mathcal{E}} c_{k+q\mathcal{E}}^* c_{k\mathcal{E}} c_{k'-q,-\mathcal{E}}^* c_{k',-\mathcal{E}} \quad (10)$$



II. MAGNONES

Nuestro sistema de electrones tendrá, en su nivel fundamental, una energía que llamaremos E_{fund} . Este estado fundamental puede ser no-magnético, ferromagnético parcial o ferromagnético total.

Si $c_{k\mathcal{E}}^*$ es el operador que crea un electrón en el estado $k\mathcal{E}$, el operador B_{kq}^* definido:

$$B_{kq}^* = c_{k+q}^* c_{k_i} \quad (1)$$

aplicado a un estado, en particular el fundamental, quita un electrón del estado $|k_i\rangle$ y lo coloca en el $|k+q\rangle$.

De esta forma hemos construido una excitación del sistema, a la que le corresponde una energía $E_{k+q} - E_{k_i}$. Esta excitación baja el spin total en una unidad.

Sin embargo al aplicar el operador B_{kq}^* al estado fundamental estamos excitando individualmente un electrón al estado $|k+q\rangle$ y creando un agujero en $|k_i\rangle$. La interacción mezcla estos estados electrón-agujero con otros del mismo impulso. Queremos construir un operador que nos dé un estado estacionario del sistema. La forma más simple de hacerlo es escribir una combinación lineal de B_{kq}^* , cada uno afectado por un factor de peso a_k .

Queda definido entonces:

$$B^*(q) = \sum_k a_k c_{k+q}^* c_{k_i} \quad (2)$$

Según veremos luego, este operador crea un magnón de pseudoimpulso q .

Es de esperar que una excitación de este tipo tenga una energía menor que la de invertir el spin de un único electrón para pequeños valores del impulso q .

Queremos entonces determinar a_k de forma tal que

$$(H, B^*(q)) = E B^*(q) \quad (3)$$

Porque si esto es cierto, se sigue que:

$$(H, B^*(q)) \Psi_{\text{fund}} = E B^*(q) \Psi_{\text{fund}}$$

$$(H, B^*(q)) \Psi_{\text{fund}} = H B^*(q) \Psi_{\text{fund}} - B^*(q) H \Psi_{\text{fund}}$$

$$H B^*(q) \Psi_{\text{fund}} - B^*(q) E_{\text{fund}} \Psi_{\text{fund}}$$

$$H B^*(q) \Psi_{fund} = (E_{fund} + E) B^*(q) \Psi_{fund} \quad (4)$$

Luego $B^*(q) \Psi_{fund}$ será un autoestado aproximado del Hamiltoniano H (dentro de la RPA) con energía $E_{fund} + E$; donde E es la energía de excitación del sistema, que corresponde a la energía de los magnones.

$$E = \hbar \omega_{magnón}$$

Para hallar E usaremos el método de la ecuación de movimiento.

Calculamos en primer término:

$$i \dot{B}_{kq}^* = (H, B_{kq}^*)$$

Donde H está dado por (I.10).

Entonces:

$$\begin{aligned} & \left(\sum_{k', \epsilon} E_{k', \epsilon} c_{k', \epsilon}^* c_{k', \epsilon}, c_{k+q, \epsilon}^* c_{k, \epsilon} \right) = (E_{k+q, \epsilon} - E_{k, \epsilon}) B_{kq}^* \quad (3b) \\ & \frac{1}{2} U/N \left(\sum_{k', k'', q', \epsilon} c_{k'+q', \epsilon}^* c_{k', \epsilon} c_{k'', -\epsilon}^* c_{k'', -\epsilon}, c_{k+q, \epsilon}^* c_{k, \epsilon} \right) = \\ & = -U/N \sum_{k', q', \epsilon} c_{k+q, \epsilon}^* c_{k-q, \epsilon} c_{k', -\epsilon}^* c_{k', \epsilon} \\ & - U/N \sum_{k', q', \epsilon} c_{k, \epsilon} c_{k'+q', \epsilon}^* c_{k', \epsilon} c_{k+q-q', \epsilon}^* \quad (4b) \end{aligned}$$

Con los términos de interacción entre electrones usamos la llamada Random Phase Approximation (RPA)⁽¹⁸⁾. Consiste en tomar de la sumatoria sólo aquellos términos proporcionales a n_k , operadores de número de electrones, para tomar sus valores medios \bar{n}_k , usando la aproximación de Hartree-Fock.

El primer sumando de (4) da:

$$-U/N \sum_{k'} n_{k'} B_{kq}^* - U/N \sum_{q'} n_{k+q'} c_{k-q', \epsilon}^* c_{k+q-q', \epsilon}^* \quad (5)$$

Y el segundo:

$$U/N \sum_{k'} n_{k'} B_{kq}^* + U/N \sum_{k'} n_{k'} c_{k', \epsilon} c_{k'+q', \epsilon}^* \quad (6)$$

Los primeros términos de (5) y (6) los podemos sumar a las energías $E_{k\epsilon}$, y nos dan las energías Hartree-Fock del Hamiltoniano original.

$$E_{k+q!} - E_{k!} = e_{k+q} - e_k + gU/B + U/N \sum_{k'} (n_{k'i} - n_{k'i'}) \quad (7)$$

Con lo que la ecuación de movimiento resulta

$$i\dot{B}_{kq}^* = (H, B_{kq}^*) = (E_{k+q!} - E_{k!}) B_{kq}^* + (n_{k+q!} - n_{k!}) U/N \sum_{k'} B_{kq}^* \quad (8)$$

El operador de creación de magnones es:

$$B^*(q) = \sum_k a_k B_{kq}^*$$

Usamos (8)

$$(H, B^*(q)) = (H, \sum_k a_k B_{kq}^*) = \sum_k a_k (H, B_{kq}^*) = E \sum_k a_k B_{kq}^*$$

Entonces:

$$\sum_k a_k (E - (E_{k+q!} - E_{k!})) B_{kq}^* = U/N \sum_{k'} (n_{k+q!} - n_{k!}) a_k B_{kq}^* \quad (9)$$

Por la independencia de los B_{kq}^* obtenemos el conjunto de ecuaciones:

$$a_k (E - (E_{k+q!} - E_{k!})) = U/N \sum_{k'} (n_{k'+q!} - n_{k'i'}) a_{k'} \quad (10)$$

El segundo miembro es una constante A independiente de k. Resolviendo para a_k :

$$a_k = \frac{A}{E - (E_{k+q!} - E_{k!})} \quad (11)$$

y reemplazando en (10)

$$U/N \sum_k \frac{n_{k+q!} - n_{k!}}{E - (E_{k+q!} - E_{k!})} = 1 \quad (12)$$

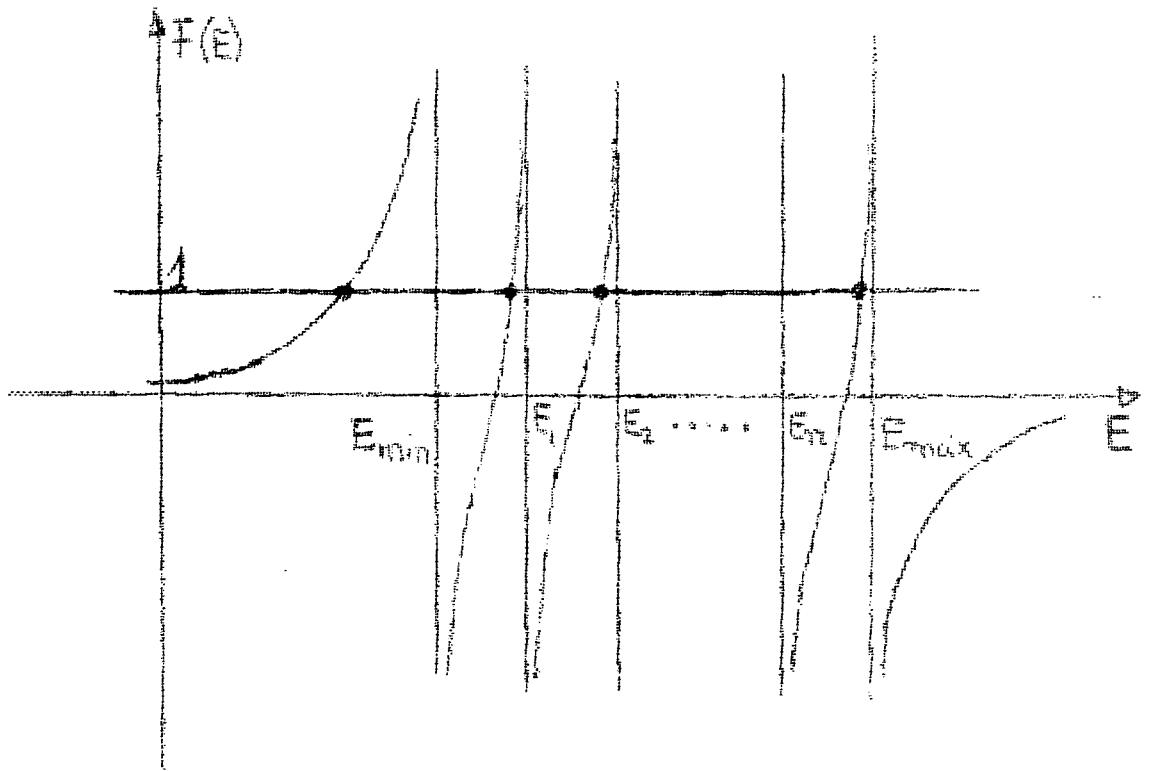
Los autovalores E pueden hallarse mediante una discusión gráfica. (2)(10)
 Sea F(E) la función de E en el primer miembro de (12). F(E) es infinita cuando:

$$E = E_i(q) = E_{k+q!} - E_{k!}$$

las energías de excitación.

Las E_i s están acotadas por una $E_{min}(q)$ y una $E_{max}(q)$. La función F(E) tiene el comportamiento indicado en la figura (para un dado valor de q).

Las raíces corresponden a $F(E) = 1$.



Si hay para ese valor de q M energías de excitación $E_i(q)$, encontramos ahora $M-1$ raíces muy cerce de los valores E_i . Son las energías de las excitaciones individuales. La última raíz, menor que E_{min} , está bien separada y corresponde a una excitación colectiva, o sea una onda de spin.

Si la energía de la excitación colectiva está separada del pseudocontinuo de excitaciones individuales podremos reemplazar la suma (12) por una integral.

$$\frac{U}{8\pi^3} \int \frac{n_{k+q}^{-n_{k_i}}}{E - (E_{k+q} - E_{k_i})} d^3k = 1 \quad (13)$$

Cuando q tiende a 0, E tiende a cero. Resolveremos la ecuación (13) para q pequeños y veremos que E es proporcional a Dq^2 .

Usamos (II.7) y defino la magnetización por átomo m como

$$m = 1/N (n_i - n_{\downarrow i})$$

$$Y \quad E' = E - Um - g \mu_B G$$

Reemplazando en (13) tenemos:

$$\frac{U}{8\pi^3} \int \frac{n_{k+q}!^{-n_{k_i}}}{E' - (e_{k+q} - e_k)} d^3k = 1 \quad (14)$$

Podemos separar esta integral en otras dos, el resultado será sólo función de q. Escribimos entonces:

$$U/8\pi^3 (A_+(q) - A_-(q)) = 1$$

Donde:

$$A_+(q) = \int \frac{n_k! d^3k}{E' - (e_k - e_{k-q})} \quad (15)$$

y

$$A_-(q) = \int \frac{n_{k_i} d^3k}{E' - (e_{k+q} - e_k)} \quad (16)$$

Escribiendo explícitamente e_{k+q} y e_{k-q} en función de q y desarrollando A_+ y A_- hasta el segundo orden en q, tenemos:

$$E - g_{\mu B}^{\mu} G = U (n_+! 2e_q/E' (4E_{F_+}/5E' - 1) - n_-! 2e_q/E' (4E_{F_-}/5E' - 1)) \quad (17)$$

Donde E_{F_+} y E_{F_-} son las energías de Fermi "up" y "down", respectivamente.

Haciendo la aproximación:

$$E' \approx -Um \quad (18)$$

Tenemos, definiendo $n = n_+ + n_-$:

$$E = g_{\mu B}^{\mu} G + 2e_q (n/m + 4/5Um^2 (n_+! E_{F_+} - n_-! E_{F_-})) \quad (19)$$

Y se puede escribir:

$$E = g_{\mu B}^{\mu} G + Dq^2$$

Donde

$$D = \pi^2/2m^* (n/m + (n_+! E_{F_+} - n_-! E_{F_-})4/5Um^2) \quad (20)$$

Y hemos obtenido el mismo tipo de curva de dispersión de magnones, para q pequeños, que en el modelo de Heisenberg.

NOTA: Desde la fórmula (5) en adelante donde dice n, debe entenderse, no el operador sino el valor medio \bar{n} , pues se ha usado la aproximación H-F.

III. INTERACCIONES INTERATOMICAS

El Hamiltoniano de bandas establecido en la Secc.I es del tipo (I.5)

$$H = H_0 + \sum_i H_i$$

Donde H_0 es la energía cinética de los electrones en un potencial de Bloch, y en un campo magnético constante G ; y H_i es un término de interacción entre los electrones cuyos orbitales están centrados en el átomo i .

En el caso de tener una banda d sin degeneración orbital este Hamiltoniano se escribe explícitamente (I.6):

$$H = \sum_{k\&} E_{k\&} c_{k\&}^* c_{k\&} + \frac{1}{2} U \sum_{i\&} c_{i\&}^* c_{i\&} c_{i,-\&}^* c_{i,-\&}$$

Donde: $c_{k\&}^*$ crea un electrón de impulso k y spin $\&$
 $c_{i\&}^*$ crea un electrón en el sitio i , con spin $\&$.

y $E_{k\&} = e_k - \frac{1}{2} g_{\&} \mu_B G$

Con $\& = \begin{cases} 1 & \text{si } \& = j \\ -1 & \text{si } \& = ! \end{cases}$

Nos interesa ahora considerar los efectos de repulsión coulombiana e intercambio entre electrones orbitando en distintos núcleos.

Manteniéndonos en el formalismo de segunda cuantificación, este término de interacción puede escribirse en la forma:

$$H^I = \frac{1}{2} \sum_{ij} (U_{ij}^I - J_{ij}^I) c_{i\&}^* c_{i\&} c_{j\&}^* c_{j\&} + \frac{1}{2} \sum_{ij\&} U_{ij}^I c_{i\&}^* c_{i\&} c_{j,-\&}^* c_{j,-\&} \quad (1)$$

Escrito en esta forma tenemos la energía de un electrón situado en i , interactuando con todos los demás del metal. Dentro del sólido los potenciales se apantallan rápidamente, por lo tanto nos interesa sólo la influencia sobre i de los electrones pertenecientes a los primeros vecinos próximos. Si designamos con un índice d a cada uno de los vecinos próximos podemos escribir en el H^I .

$$j = i + d$$

y $\bar{R}_j = \bar{R}_i + \bar{d}$

En un cálculo inicial consideraremos a los iones fijos (no hay excitación de fonones.

U^I y J^I , integrales de Coulomb y de intercambio interatómicas dependen sólo de la separación entre los núcleos $R_i - R_{i+d}$. Obviamente, por simetría de traslación (No consideraremos efectos de borde) U^I y J^I no dependen de i . Y si consideramos un sistema cristalino tal que las distancias de un átomo a sus primeros vecinos sean todas iguales en módulo (P.Ej. una red cúbica), tampoco dependerán del índice d .

Luego:

$$H^I = \frac{1}{2}(U^I - J^I) \sum_{i\mathcal{E}} c_{i\mathcal{E}}^* c_{i\mathcal{E}} c_{i+d\mathcal{E}}^* c_{i+d\mathcal{E}} + \frac{1}{2} U^I \sum_{i\mathcal{E}} c_{i\mathcal{E}}^* c_{i\mathcal{E}} c_{i+d,-\mathcal{E}}^* c_{i+d,-\mathcal{E}} \quad (2)$$

Transformando Fourier los $c_{i\mathcal{E}}$.

$$c_{i\mathcal{E}} = 1/\sqrt{N} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\mathcal{E}} e^{-i\mathbf{k}\cdot R_i}$$

Obtenemos:

$$H^I = \frac{1}{2}(U^I - J^I)/N \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{d}\mathcal{E}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\mathcal{E}}^* c_{\mathbf{k}\mathcal{E}} c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\mathcal{E}}^* c_{\mathbf{k}'\mathcal{E}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{d}} + \frac{1}{2} U^I/N \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{d}\mathcal{E}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\mathcal{E}}^* c_{\mathbf{k}\mathcal{E}} c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},-\mathcal{E}}^* c_{\mathbf{k}',-\mathcal{E}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{d}} \quad (3)$$

Y el hamiltoniano de banda será la suma de (I,10) y (III.3)

$$H = \sum_{\mathbf{k}\mathcal{E}} E_{\mathbf{k}\mathcal{E}} c_{\mathbf{k}\mathcal{E}}^* c_{\mathbf{k}\mathcal{E}} + \frac{1}{2} U/N \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathcal{E}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\mathcal{E}}^* c_{\mathbf{k}\mathcal{E}} c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},-\mathcal{E}}^* c_{\mathbf{k}',-\mathcal{E}} + \frac{1}{2} U^I/N \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{d}\mathcal{E}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{d}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\mathcal{E}}^* c_{\mathbf{k}\mathcal{E}} c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},-\mathcal{E}}^* c_{\mathbf{k}',-\mathcal{E}} + \frac{1}{2} (U^I - J^I) \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{d}\mathcal{E}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{d}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\mathcal{E}}^* c_{\mathbf{k}\mathcal{E}} c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\mathcal{E}}^* c_{\mathbf{k}'\mathcal{E}} \quad (4)$$

Calculemos ahora

$$i\dot{\beta}_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^* = (H, \beta_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^*)$$

El conmutador de la primera parte del Hamiltoniano fue calculado en la sección anterior (II.3b) y (II.4b).

La segunda parte es:

$$\begin{aligned}
 (H^I, B_{kq}^*) &= -U^I/N \sum_{k'q'd} e^{-iq'.d} c_{k_i} c_{k'+q'_i}^* c_{k'_i} c_{k+q-q'}^* \\
 &\quad -U^I/N \sum_{k'q'd} e^{-iq'.d} c_{k+q}^* c_{k-q'_i} c_{k'-q'_i}^* c_{k'_i} \\
 &\quad - (U^I - J^I)/N \sum_{k'q'd} e^{-iq'.d} c_{k_i} c_{k'+q'_i}^* c_{k'_i} c_{k+q-q'}^* \\
 &\quad - (U^I - J^I)/N \sum_{k'q'd} e^{-q'.d} c_{k+q}^* c_{k-q'_i} c_{k'-q'_i}^* c_{k'_i} \quad (5)
 \end{aligned}$$

Usamos nuevamente para los términos de interacción la RPA y H-F. Para la parte intra-atómica nos remitimos a (II.5) y (II.6). Para la parte interatómica tenemos de (III.5):

$$\begin{aligned}
 (H^I, B_{kq}^*) &= -U^I/N \sum_{k'} n_{k'} B_{kq}^* + U^I/N \sum_{k'} n_{k'_i} B_{kq}^* \\
 &\quad + U^I/N \sum_{k'd} e^{i(k'-k).d} n_{k+q} c_{k'+q}^* c_{k'_i} \\
 &\quad - U^I/N \sum_{k'd} e^{i(k'-k).d} n_{k_i} c_{k'+q}^* c_{k'_i} \\
 &\quad + (U^I - J^I)/N \sum_{k'} n_{k'_i} B_{kq}^* - (U^I - J^I)/N \sum_{k'} n_{k'_i} B_{kq}^* \\
 &\quad - (U^I - J^I)/N \sum_{k'd} e^{i(k'-k).d} n_{k'_i} B_{kq}^* \\
 &\quad + (U^I - J^I)/N \sum_{k'd} e^{i(k'-k-q).d} n_{k'} B_{kq}^* \quad (6)
 \end{aligned}$$

Los términos en B_{kq}^* pueden sumarse y renormalizan la energía cinética. Se agrupan, además los términos en $\sum_{k'} B_{k'q}^*$.

La ecuación de movimiento es, entonces:

$$\begin{aligned}
 i\dot{B}_{kq}^* &= (H, B_{kq}^*) = (E_{k+q} - E_{k_i}) B_{kq}^* \\
 &\quad + (n_{k+q} - n_{k_i}) U/N \sum_{k'} B_{kq}^* \\
 &\quad + (n_{k+q} - n_{k_i}) U^I/N \sum_{k'd} e^{i(k'-k).d} B_{kq}^* \quad (7)
 \end{aligned}$$

Donde la energía cinética E_{k_i} es ahora:

$$E_{k\mathcal{E}} = e_k - \frac{1}{2} \frac{g^2}{B} G + (U + U^I)/N \sum_{k'} n_{k', -\mathcal{E}} + \\ + (U^I - J^I)/N \sum_{k', d} (1/Z + e^{i(k'-k) \cdot d}) n_{k', \mathcal{E}} \quad (8)$$

Donde Z es el número de primeros vecinos a un átomo dado.

Nuevamente, queremos determinar a_k tal que

$$(H, B^*(q)) = (H, \sum_k a_k B_{kq}^*) = EB^*(q)$$

Y procediendo en forma similar a la sección anterior obtenemos:

$$\sum_k a_k (E - (E_{k+q} - E_{k_i})) B_{kq}^* = \sum_{k'} a_{k'} (n_{k'+q} - n_{k'_i}) (U + U^I \sum_d e^{i(k'-k) \cdot d}) / N B_{kq}^* \quad (9)$$

Y, por la independencia de los B_{kq}^* es:

$$a_k (E - (E_{k+q} - E_{k_i})) = U/N \sum_{k'} (n_{k'+q} - n_{k'_i}) a_{k'} \\ + U^I/N \sum_{k', d} e^{i(k'-k) \cdot d} (n_{k'+q} - n_{k'_i}) a_{k'} \quad (10)$$

Y si bien el primer término de (10) es igual a (II.10), el segundo término presenta una dependencia de k en la exponencial que nos impide igualar el segundo miembro a una constante independiente de k , como hicimos en la sección II. Para despejar los a_k debemos resolver este sistema de N ecuaciones homogéneas. Anulando el determinante del sistema tendríamos los valores de E , que son soluciones de la energía.

Una forma de resolverlo podría ser considerar U^I como una perturbación en U , dado que U^I , de acuerdo a los datos citados en la Introducción⁽¹⁶⁾ es del orden de diez veces menor que U . O sustituir la sumatoria por una integral sobre k , y nos queda una ecuación integral.

Una discusión más detallada y completa de este problema, en el formalismo de primera cuantificación, puede verse en el artículo citado de Thompson⁽¹⁶⁾.

$$+ dR_{i+d} \cdot \int \Psi^*(x, R_i^0) \Psi^*(y, R_{i+d}^0) \nabla_{R_{i+d}} \Psi(y, R_{i+d}^0) \nabla_{R_i} \Psi(x, R_i^0) dx dy \quad (3)$$

Despreciando en el desarrollo los términos de orden superior al primero.

Así como U^{I_0} y J^{I_0} no dependían de los índices i y d , los coeficientes de dR_i y dR_{i+d} tampoco dependen de los índices de suma, dado que son funciones de R_i^0 y R_{i+d}^0 . Además si en los dos últimos sumandos cambiamos las variables de integración y conmutamos, tenemos que el coeficiente de dR_{i+d} y el de dR_i son iguales y de signo contrario, y los designaremos ∇U ; y al que corresponde a la integral de intercambio ∇J . Podemos escribir:

$$U^I = U^{I_0} + \nabla U \cdot (dR_i - dR_{i+d}) \quad (4)$$

$$Y \quad J^I = J^{I_0} + \nabla J \cdot (dR_i - dR_{i+d}) \quad (5)$$

Los términos en U^{I_0} y J^{I_0} nos dan el Hamiltoniano de interacción interatómica que discutimos en la Secc. III. Los segundos términos de (IV.4) y (IV.5) originan el Hamiltoniano de interacción electrón-fonón.

$$H_{el-f} = \frac{1}{2} (\nabla U - \nabla J) \cdot \sum_{i,d} (dR_i - dR_{i+d}) c_{i\mathcal{E}}^* c_{i\mathcal{E}} c_{i+d\mathcal{E}}^* c_{i+d\mathcal{E}} + \frac{1}{2} \nabla U \cdot \sum_{i,d} (dR_i - dR_{i+d}) c_{i\mathcal{E}}^* c_{i\mathcal{E}} c_{i+d,-\mathcal{E}}^* c_{i+d,-\mathcal{E}} \quad (6)$$

Desarrollamos los desplazamientos dR en función de los operadores de creación y aniquilación de fonones b_k^* y b_k . Los fonones cumplen la estadística de bosones, por lo que las reglas de conmutación de los b_k son las conocidas:

$$(b_k^*, b_k^*) = (b_k, b_k) = 0 \quad (7)$$

$$(b_k^*, b_{k'}) = \delta_{kk'} \quad (7b)$$

Supongamos, en el desarrollo, para una mayor simplicidad que trabajamos con un metal puro (No hay átomos diferentes en cada celda).

El desplazamiento dR se escribe, en función de los b_k^* y los b_k (19):

$$dR_i^\alpha = \sqrt{\hbar/2NM} \sum_{kj} p^\alpha(k, j) \frac{1}{\sqrt{\Omega_j(k)}} (b_{-k, j}^* + b_{k, j}) e^{ik \cdot R_i} \quad (8)$$

Donde: α es el índice de las componentes del vector dR_i
 k es índice de estado de fonones (pseudoimpulsos)
 j " " de los modos de vibración de fonones
 $p(k, j)$ son las componentes del vector de polarización.
 $\Omega_j(k)$ es la frecuencia de fonones en el modo j , de pseudoimpulso k .

M es la masa atómica del metal.

En lo que sigue, y para una mayor simplicidad en el manejo de los índices, la suma sobre j quedará sobreentendida, y, en el producto escalar del Hamiltoniano (6), la suma sobre el índice α queda también sobreentendida.

De acuerdo a la fórmula (8), podemos escribir:

$$(dR_i^\alpha - dR_{i+d}^\alpha) = \sqrt{\hbar/2NM} \sum_k p^\alpha(k) \frac{1}{\sqrt{\Omega(k)}} (b_k^* + b_{-k}) e^{ik \cdot R_i} (1 - e^{ik \cdot d}) \quad (9)$$

Reemplazando en el Hamiltoniano (6), obtenemos:

$$H_{el-f} = \frac{1}{2} (\nabla U - \nabla J) \sqrt{\hbar/2NM} \sum_{ikd\mathcal{E}} p(k) \frac{1}{\sqrt{\Omega(k)}} (b_k^* + b_{-k}) (1 - e^{ik \cdot d}) \cdot e^{ik \cdot R_i} c_{i\mathcal{E}}^* c_{i\mathcal{E}} c_{i+d\mathcal{E}}^* c_{i+d\mathcal{E}} + \frac{1}{2} \nabla U \sqrt{\hbar/2NM} \sum_{ikd\mathcal{E}} p(k) \frac{1}{\sqrt{\Omega(k)}} (b_k^* + b_{-k}) (1 - e^{ik \cdot d}) \cdot e^{ik \cdot R_i} c_{i\mathcal{E}}^* c_{i\mathcal{E}} c_{i+d, -\mathcal{E}}^* c_{i+d, -\mathcal{E}} \quad (10)$$

Pasemos de la representación c_i a la c_k .

Denominamos:

$$A = \frac{1}{2} (\nabla U - \nabla J) / N \sqrt{\hbar/2NM}$$

$$B = \frac{1}{2} \nabla U / N \sqrt{\hbar/2NM}$$

$$C(k) = \rho(k) / \sqrt{\Omega(k)}$$

Entonces queda:

$$\begin{aligned}
 H_{el-f} = & A \sum_{k_1, k_2, k_3, k_4, d} C(k_2 + k_4 - k_1 - k_3) (b_{k_2 + k_4 - k_1 - k_3}^* + b_{k_3 + k_1 - k_2 - k_4}) \cdot \\
 & \cdot (e^{i(k_3 - k_4) \cdot d} - e^{i(k_2 - k_1) \cdot d}) \cdot c_{k_1}^* c_{k_2} c_{k_3}^* c_{k_4} \\
 & + B \sum_{k_1, k_2, k_3, k_4, d} (\text{ídem}) \cdot c_{k_1}^* c_{k_2} c_{k_3}^* c_{-k_4} c_{-k_4} \quad (11)
 \end{aligned}$$

Como es de esperar, cuando $k_{\text{fonón}}$ tiende a cero:

$$k_{\text{fonón}} = k_2 + k_4 - k_1 - k_3$$

el Hamiltoniano electrón-fonón tiende a cero.

Nuestro objetivo es calcular la interacción magnón-fonón, por lo tanto queremos, con este nuevo término de interacción electrón-fonón, la ecuación de movimiento para magnones.

Debemos obtener:

$$(H_{el-f}, B_{kq}^*)$$

y este término (sumado a la ecuación de movimiento para magnones obtenida en la secc. III) nos da la interacción magnón-fonón.

Para tener (H_{el-f}, B_{kq}^*) calculemos los conmutadores siguientes:

$$\begin{aligned}
 (c_{k_1}^* \otimes c_{k_2} \otimes c_{k_3}^* \otimes c_{k_4} \otimes c_{k+q}^* \otimes c_{k_i}) &= \delta_{k+q, k_4} \delta_{\otimes} c_{k_1}^* \otimes c_{k_2} \otimes c_{k_3}^* \otimes c_{k_i} \\
 &+ \delta_{k+q, k_2} \delta_{\otimes} c_{k_1}^* \otimes c_{k_3}^* \otimes c_{k_4} \otimes c_{k_i} \\
 &- \delta_{k, k_3} \delta_{\otimes} c_{k+q}^* \otimes c_{k_1}^* \otimes c_{k_2} \otimes c_{k_4} \\
 &- \delta_{k, k_1} \delta_{\otimes} c_{k+q}^* \otimes c_{k_2} \otimes c_{k_3}^* \otimes c_{k_4} \quad (12)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (c_{k_1}^* \otimes c_{k_2} \otimes c_{k_3}^* \otimes -c_{k_4} \otimes -c_{k+q}^* \otimes c_{k_i}) &= \delta_{k+q, k_4} \delta_{-\otimes} c_{k_1}^* \otimes c_{k_2} \otimes c_{k_3}^* \otimes c_{k_i} \\
 &+ \delta_{k+q, k_2} \delta_{-\otimes} c_{k_1}^* \otimes c_{k_3}^* \otimes c_{k_4} \otimes c_{k_i} \\
 &- \delta_{k, k_3} \delta_{-\otimes} c_{k+q}^* \otimes c_{k_1}^* \otimes c_{k_2} \otimes c_{k_4} \\
 &- \delta_{k, k_1} \delta_{-\otimes} c_{k+q}^* \otimes c_{k_2} \otimes c_{k_3}^* \otimes c_{k_4} \quad (13)
 \end{aligned}$$

Introducimos estos resultados en $(H_{el-f}^{B_{kq}^*})$; y usamos, como en las secciones anteriores, la RPA y H-F.

Tenemos:

$$\begin{aligned}
 (H_{el-f}^{B_{kq}^*}) &= 2iA \sum_{k'q'd} (\text{sen}(q'-q) \cdot d + \text{sen}(k'-q') \cdot d + \text{sen}(q-k') \cdot d) \cdot \\
 &\quad \cdot C(q-q') (b_{q-q'}^* + b_{q'-q}) n_{k+k'} c_{k+q}^* \otimes c_{k_i} \\
 &+ 2iA \sum_{k'q'd} (\text{sen}(k-k') \cdot d + \text{sen}(k'-q') \cdot d + \text{sen}(q'-k) \cdot d) \cdot \\
 &\quad \cdot C(q'-k) (b_{q'-k}^* + b_{k-q'}) n_{k'} c_{k+q}^* \otimes c_{q'_i} \\
 &+ 2iB \sum_{k'q'd} (\text{sen}(q'-q) \cdot d) C(q-q') (b_{q-q'}^* + b_{q'-q}) n_{k'} c_{k+q}^* \otimes c_{k_i} \\
 &+ 2iB \sum_{k'q'd} (\text{sen}(q'-k) \cdot d) C(q'-k) (b_{q'-k}^* + b_{k-q'}) n_{k'} c_{k+q}^* \otimes c_{q'_i} \\
 &+ 2iB (n_{k+q} - n_{k_i}) \sum_{k'q'd} (\text{sen}(k'+q'-k-q) \cdot d + \text{sen}(k-k') \cdot d) \cdot \\
 &\quad \cdot C(q-q') (b_{q-q'}^* + b_{q'-q}) c_{k'+q}^* \otimes c_{k'_i} \quad (14)
 \end{aligned}$$

Nuestro interés es construir una ecuación de movimiento del tipo:

$$i\dot{B}^*(q) = (H, B^*(q)) = E B^*(q)$$

Y, tal como definimos en (II.2) es:

$$B^*(q) = \sum_k a_k B_{kq}^* = \sum_k a_k c_{k+q}^* c_{k_i}$$

Multiplicamos (IV.14) por a_k y sumamos sobre k , para obtener la ecuación de movimiento para magnones

En el resultado redenominamos adecuadamente los índices a fin de poner los productos de c^*c en forma de operadores B^* .

Es, entonces:

$$\begin{aligned} \sum_k a_k (H_{el-f}, B_{kq}^*) &= 2iA \sum_{k'q'd} (\text{sen}(q-q') \cdot d + \text{sen}(k'-q') \cdot d + \text{sen}(q-k') \cdot d) \cdot \\ &\quad \cdot C(q-q') (b_{q-q'}^* + b_{q'-q}) \sum_k a_k n_{k+k'} c_{k+q}^* c_{k_i} \\ &+ 2iA \sum_{k'q'd} (\text{sen}k' \cdot d + \text{sen}(-k'-q') \cdot d + \text{sen}q' \cdot d) \cdot \\ &\quad \cdot C(q') (b_{q'}^* + b_{-q'}) \sum_k a_k n_{k-k'} c_{k+q}^* c_{k+q_i} \\ &+ 2iB \sum_{k'q'd} (\text{sen}(q'-q) \cdot d) C(q-q') (b_{q-q'}^* + b_{q'-q}) n_{k'i} \sum_k a_k c_{k+q}^* c_{k_i} \\ &+ 2iB \sum_{k'q'd} (\text{sen}q' \cdot d) C(q') (b_{q'}^* + b_{-q'}) n_{k'i} \sum_k a_k c_{k+q}^* c_{k+q_i} \\ &+ 2iB \sum_{k'q'd} (\text{sen}(k'+q'-q) \cdot d + \text{sen}(-k' \cdot d)) C(q-q') \cdot \\ &\quad \cdot (b_{q-q'}^* + b_{q'-q}) \sum_k a_k (n_{k+q} - n_{k_i}) c_{k+k'+q}^* c_{k+k_i} \quad (15) \end{aligned}$$

De todos estos términos, sólo el tercer sumando se puede escribir como producto de operadores de fonones con un operador de magnones. Los restantes implican procesos más complejos de interacción electrón-fonón, con otros factores de normalización. El tercer sumando se puede escribir en la forma:

$$2iB n_i \sum_{q'd} (\text{sen}(q'-q) \cdot d) C(q-q') (b_{q-q'}^* + b_{q'-q}) B^*(q') \quad (16)$$

El cuarto sumando es de la misma forma que este, pero desgraciadamente no se puede formar un operador $B^*(q)$.

V. INTERACCION MAGNON-FONON EN EL MODELO DE HEISENBERG

El Hamiltoniano de Heisenberg es:

$$H = - \sum_{i,d} J_{i,i+d} S_i \cdot S_{i+d} \quad (1)$$

Suponiendo que J es la integral de intercambio, podemos desarrollarla en forma similar a la secc. IV y tenemos un Hamiltoniano de interacción spin-fonón:

$$H_{s-p} = - \sum_{i,d} J_{i,i+d} (dR_i - dR_{i+d}) S_i \cdot S_{i+d} \quad (2)$$

Escribimos los desplazamientos dR en función de los b_k^* y b_k . La suma sobre las componentes de los vectores del producto escalar queda sobreentendida para mayor comodidad en el manejo de índices.

$$H_{s-p} = - \sum_{i,d} \sqrt{\frac{J}{2NM}} \sum_{k,d} C(k) (b_k^* + b_{-k}) e^{ik \cdot R_i} (1 - e^{ik \cdot d}) S_i \cdot S_{i+d} \quad (3)$$

Y escribimos los S_i en función de los operadores de creación y aniquilación de magnones. Para ello aplicamos la transformación de Holstein-Primakoff⁽⁶⁾:

$$\begin{aligned} S_j^+ &= S_{jx} + iS_{jy} = (2S)^{\frac{1}{2}} (1 - a_j^* a_j / 2S)^{\frac{1}{2}} a_j \\ S_j^- &= S_{jx} - iS_{jy} = (2S)^{\frac{1}{2}} a_j^* (1 - a_j^* a_j / 2S)^{\frac{1}{2}} \\ S_{jz} &= S - a_j^* a_j \end{aligned} \quad (4)$$

Y

$$\begin{aligned} a_j &= 1/\sqrt{N} \sum_k e^{-ik \cdot R_j} B_k \\ a_j^* &= 1/\sqrt{N} \sum_k e^{ik \cdot R_j} B_k^* \end{aligned} \quad (5)$$

Entonces:

$$\begin{aligned} S_i \cdot S_{i+d} &= S_{ix} S_{i+dx} + S_{iy} S_{i+dy} + S_{iz} S_{i+dz} = \\ &= \frac{1}{2} (S_i^+ S_{i+d}^- + S_i^- S_{i+d}^+) + S_{iz} S_{i+dz} \end{aligned} \quad (6)$$

Desarrollando S^+ y S^- hasta el primer orden en B y B*, respectivamente, obtenemos:

$$S_j^+ = 2S/N \sum_k e^{-ik \cdot R_j} B_k$$

$$S_j^- = 2S/N \sum_k e^{ik \cdot R_j} B_k^*$$
(7)

$$Y \quad S_{jz} = S-1/N \sum_{kk'} e^{i(k-k') \cdot R_j} B_{k'}^* B_k$$
(8)

Entonces el Hamiltoniano magnón-fonón será (No considerando los términos que no contienen operadores B, que no contribuirán a la ecuación de movimiento):

Llamamos $Z = \sum_j S_j^2 / 2NM^2$

$$H_{\text{mag-f}} = -Z/N \sum_{jkk'k''d} C(k) (b_{k'}^* + b_{-k}) e^{ik \cdot R_j} (1 + e^{ik \cdot d}) \cdot (e^{-i(k'-k'') \cdot R_j} e^{ik' \cdot d} B_{k''}^* B_{k'} + e^{i(k'-k'') \cdot R_j} e^{-ik'' \cdot d} B_{k'}^* B_{k''} - e^{i(k'-k'') \cdot R_j} B_{k'}^* B_{k''} - e^{i(k'-k'') \cdot (R_j+d)} B_{k'}^* B_{k''}) \quad (9)$$

Efectuando la suma indicada sobre j tenemos:

$$H_{\text{mag-f}} = -Z \sum_{kq'd} C(k-q') (b_{k-q'}^* + b_{q'-k}) (1 - e^{i(k-q') \cdot d}) e^{ik \cdot d} B_{q'}^* B_k$$

$$-Z \sum_{kq'd} C(k-q') (b_{k-q'}^* + b_{q'-k}) (1 - e^{i(k-q') \cdot d}) e^{-ik \cdot d} B_{q'}^* B_k$$

$$+Z \sum_{kq'd} C(k-q') (b_{k-q'}^* + b_{q'-k}) (1 - e^{i(k-q') \cdot d}) B_{q'}^* B_k$$

$$+Z \sum_{kq'd} C(k-q') (b_{k-q'}^* + b_{q'-k}) (e^{i(q'-k) \cdot d} - 1) B_{q'}^* B_k \quad (10)$$

Y calculando la ecuación de movimiento es:

$$i\dot{B}_q^* = (H_{\text{mag-f}}, B_q^*) = Z \sum_{q' d} C(q-q') (2i \text{sen}(q'-q) \cdot d - 2(1 - e^{i(q-q') \cdot d}) \cos q \cdot d) \cdot (b_{q-q'}^* + b_{q'-q}) B_{q'}^*$$
(11)

VI. CONCLUSIONES

Escribamos los términos de interacción magnón-fonón de la ecuación de movimiento de los $B^*(q)$, en el modelo de bandas (IV.16) y en el modelo de Heisenberg (V.11).

$$i\sqrt{U} \sqrt{\frac{1}{\hbar/2NM}} \sum_i \frac{n_i}{N} \sum_{q',d} C(q-q') \sin(q'-q) \cdot d (b_{q-q'}^* + b_{q'-q}) B^*(q') \quad (IV.16)$$

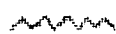
$$\sqrt{J} \sqrt{\frac{1}{\hbar/2NM}} S \sum_{q',d} C(q-q') (2i \sin(q'-q) \cdot d - 2(1 - e^{i(q-q') \cdot d}) \cos q \cdot d) \cdot (b_{q-q'}^* + b_{q'-q}) B^*(q') \quad (V.11)$$


Donde U^I y J^I eran, respectivamente, las integrales de Coulomb y de intercambio interatómicas.

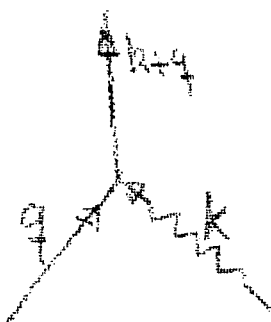
Estas dos expresiones son idénticas en su forma y pueden compararse debido a que los Hamiltonianos que las originen (IV.11) y (V.10) implican interacciones magnón-fonón iguales. En efecto, ambos describen procesos del tipo:

$$(b_{-k}^* + b_k) B^*(k+q) B(q)$$

Que pueden representarse graficamente:

 fonones

 magnones



$$b_k B^*(k+q) B(q)$$



$$b_{-k}^* B^*(k+q) B(q)$$

Las diferencias entre ambas expresiones surgen de los términos en d , más complejo en el modelo localizado, pero que se pueden suponer del mismo orden. El factor S (spin atómico) que aparece en (V.11) se transforma en n_i/N en el modelo de banda. Por razones de simetría debería existir un término en n_i/N . Pero como vimos en la sección IV este término no puede escribirse como producto de operadores de fonones por $B^*(q)$. Tal vez pueda hacerse definiendo el operador $B^*(q)$ en otra forma.

La diferencia más notable es ∇U y ∇J en ambos términos. Por ejemplo si la integral de intercambio interatómica es J , la interacción magnón-fonón no se altera, en el modelo de banda, y vale cero en el localizado (Como es de esperar, dado que se anula también el Hamiltoniano de Heisenberg).

Las diferencias que puedan surgir en valores numéricos provendrán casi exclusivamente de la diferencia de valores entre ∇U y ∇J , y también del factor que depende de la estructura del cristal; pero el comportamiento fenomenológico del material es idéntico en ambos modelos. Para una discusión de este último aspecto puede consultarse el artículo citado de Kittel⁽¹³⁾.

REFERENCIAS

- (1) Hubbard J., Proc. Roy. Soc. 276,238 (1963)
- (2) Blandin A., Band Magnetism, in Theory of Condensed Matter.(Ed. IAEA),1968.
- (3) Rajagopal A. K. y Joshi S.K., Phys. Lett. 24A,95 (1967)
- (4) Alascio B.R. y López A., J. Phys. Chem. Solids (A publicarse)
- (5) Mott N.F., Adv. Phys. 13,325 (1964)
- (6) Kittel C., Quantum Theory of Solids, (Ed. John Wiley & Sons), 1963
- (7) Anderson P., Solid State Physics (Seitz & Turnbull Ed.) 14,99 (Academic Press) 1963
- (8) Slater J., Rev. Mod. Phys. 25,199 (1952)
- (9) Mattis D.C., The Theory of Magnetism (Harper & Row)1965. Pág 33y Cap.7
- (10) Brout, Phase Transition (Benjamin) 1965
- (11) Herring C., Exchange Interactions among Itinerant Electrons, in Magnetism IV (Rado & Suhl Ed.)(Academic Press) 1966
- (12) Gutzwiller M.C., Phys. Rev. Lett. 10,159 (1963)
- (13) Kittel C., Phys. Rev. 110,836(1958)
- (14) Pytte E., Ann.Phys.32,377 (1965)
- (15) Bakre R.V.,Joshi A.W. y Sinha K.P., Indian J. Pure Appl.Phys. 5, 205 (1967)
- (16) Thompson E.D., Adv.Phys. 14,213 (1965)
- (17) Pines D. y Nozières P., Quantum Liquids (Benjamin) 1966. Apéndice
- (18) Carmi, Many Body Concepts, in Latin America School of Physics (Moshinsky & Brody Ed.) (Gordon & Breach) 1966
- (19) Maradudin, Montroll y Weiss, The Theory of Lattice Dynamics in the Harmonic Aproximation. Solid State Physics (Seitz & Turnbull Ed.) Suppl.3. (Academic Press) 1963.
